

# 審査の結果の要旨

論文提出者氏名 安田 真也

相転移に伴う臨界現象の理解は統計物理学研究における最も重要なテーマのひとつである。シミュレーションによる臨界現象の分類には、臨界指数などの臨界性を定量的に特徴づける量を精度良く求めることが不可欠であるが、系に強い空間的異方性がある場合には、強い有限サイズ効果など、精密な解析が難しい場合も多い。さらに、量子系に対するモンテカルロ法においては、虚時間と呼ばれる新たな軸を導入して量子ゆらぎを正確に取り込むが、これにより新たな長さスケール因子が導入されるだけでなく、もう一つの非自明な臨界指数(動的臨界指数)があらわれる場合もある。本論文では量子モンテカルロ法と確率的最適化によるパラメタ最適化を組み合わせることで、強い空間的異方性がある系における長さスケールの非自明な補正とその起源を発見し、また、ランダムネスをもつ量子系における特異な動的臨界性を明らかにした。

第一章は緒言であり、系のアスペクト(縦横)比が相転移現象のシミュレーション結果に与える影響について、先行研究の紹介を交えつつ述べられている。空間的な異方性のある相互作用を持つスピン模型においては、スタンダードな有限サイズスケール解析がうまく働かない場合も多いこと、強い虚時間異方性がある際に動的臨界指数の推定を誤ると正しく基底状態の計算が出来ないことなどの問題点を述べ、これを自動的に調整する手法の必要性が強調されている。

第二章では、まず、臨界的な系が示す性質を紹介した後、有限サイズのシミュレーションから臨界的な性質を得るための手続きである有限サイズスケール解析が、特に時空異方性のある場合を念頭に置いて説明されている。後半では、ランダムネスが存在するモデルの導入が行われている。

第三章は、量子モンテカルロ法のレビューである。マルコフ連鎖モンテカルロ法、また、本論文で用いられているループアルゴリズム・ワームアルゴリズムと、物理量の測定法に関して解説されている。

第四章では、確率的最適化によるアスペクト比の自動調整とその拡張が詳細に述べられている。特にモンテカルロ法と組み合わせて用いる場合の有効性を、通常のNewton法を用いたパラメタ推定と比較することで実証し、またその収束性について議論されている。さらに、ランダムネスがある系において、ランダム平均と確率的最適化を組み合わせた新しい手法が導入されている。

第五章・第六章では、第四章で述べられた確率的最適化手法を具体的な物理系に応用している。まず第五章では、相互作用に空間的な異方性がある量子反強磁性ハイゼンベルグ模型に関する解析結果が示されている。この模型は非常に強い有限サイズ補正があることが知られていたが、本論文ではその物理的な起源を明らかにし、有効アスペクト比のサイズ依存性という形で観測できることを示した。後半では、アスペクト比の最適化によって、虚時間の異方性を示す尺度である動的臨界指数を精度よく測定できることを、磁場中XY模型の量子臨界現象について示した。

第六章では、まず、相互作用にランダムネスがある量子反強磁性ハイゼンベルグ鎖の基底状態の解析が行われている。ランダムネス存在下では、動的臨界指数が相互作用の分布に依存して非ユニバーサルな値をとることが知られているが、その振る舞いが定量的に再現できることが示されている。加えて、波動関数の巻きつき数のシステムサイズ依存性を調べることでランダムシングレット臨界性と量子グリフィス臨界性が明確に区別できることも明らかにした。その上で、ランダム磁場中の2次元XYモデルにおける量子相転移が議論されている。このモデルではランダムネスの導入に伴いボーズグラス転移が起こることが知られており、様々な数値計算が行われているが、その動的臨界現象については議論が分かれている。本章では、確率的最適化により精密に動的臨界指数を評価し、動的臨界指数が空間次元に等しいとする理論的な予言が2次元では成立していないことを明確に示した。

第七章は本論文の結言であり、本論文で新たに得られた知見についてまとめられている。

本論文は、これまでシミュレーションにあたって経験的に決められていた種々のパラメータやランダムネスに関するサンプル個数が自動的に決定され、計算コスト的に最適な形状が自動的に選ばれる計算手法を提案し、またそれを用いて有効アスペクト比に対する非自明な補正の存在やランダム量子系の動的臨界指数を定量的に明らかにした点で大きなインパクトがあり、高く評価される。なお、本論文の内容は、指導教員(藤堂)、また、諏訪秀磨氏との共同研究であるが、手法の開発、シミュレーションの実行、解析などに関して、論文提出者本人の寄与が主であると判断される。

よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。